

特別研究報告書

相関係数の制約つき最適化問題に対する  
ブロック座標降下法

指導教員 山下信雄 教授

京都大学工学部情報学科  
数理工学コース  
平成 22 年 4 月入学

高 正義

平成 27 年 1 月 30 日提出

## 摘要

複数の確率変数からなるグループが2つあるとき、それらのグループ内の確率変数の線形和もまた確率変数となる。2つの確率変数グループの関係性を知る指標として、その線形和の相関係数がしばしば着目される。相関係数は、線形和の共分散を標準偏差の積で割った値で定義され、線形和を与えるパラメータの分数関数として表される。相関係数を用いて分析する手法として正準相関分析が知られている。正準相関分析では、相関係数を最大化するパラメータを求める必要がある。ここではパラメータに制約がないため、その最大化問題は一般化固有値問題を解くことで求めることができる。しかしながら、パラメータに何らかの制約が課されると、そのようにして解くことができない。

本報告書では、線形和を与えるパラメータに、線形な制約条件が与えられているとき、その制約条件のもとで相関係数を最小化するパラメータを求める手法を提案する。2つの確率変数グループのパラメータのうち、どちらか一方を固定すると、相関係数の分母と分子はもう一方のパラメータに関して凸関数となる。その性質を利用して、ブロック座標降下法を適用する。さらに座標降下法の部分問題は、分散共分散行列の性質を利用することで、パラメトリックな二次錐計画問題に帰着できる。二次錐計画問題は、内点法などで効率よく解くことができるため、部分問題の解は高速に得られる。本報告書では、数値実験によって既存の非線形最適化に対する一般的なアルゴリズムとの比較を行った。その結果、大規模問題に対して提案手法はより短時間で解を得られることを確認した。

## 目次

1	序論	1
2	準備	3
2.1	相関係数	3
2.2	ブロック座標降下法	4
2.3	分数計画問題	4
2.4	二次錐計画問題	6
3	相関係数の制約つき最適化モデル	6
3.1	ポートフォリオ最適化問題	7
4	相関係数の制約つき最適化モデルに対する解法	8
5	数値実験	10
5.1	テスト問題の作成	10
5.2	数値実験	11
6	結論と今後の課題	14
	参考文献	14

# 1 序論

情報社会が成熟するにしたがって、多様なデータが収集、利用されるようになってきている。特に近年では、ビッグデータの活用に注目が集まるなど、データ数が莫大なものとなることが多い。膨大なデータから必要な情報を得るためには、数理モデルや、その数理モデルを解析する手法が重要になる。

ある確率分布に従って生成されたデータが与えられたとき、2つのデータ間の近さを調べることは重要な課題の一つである。データ間の近さは、データ圧縮や将来予測に利用できる。いま、よく似た2つのデータ  $\{A_i\}$  と  $\{B_j\}$  があり、 $\{A_i\}$  が  $\{B_j\}$  に比べてデータ量が大きければ、データ  $\{A_i\}$  を記憶する代わりにデータ  $\{B_j\}$  を記憶すれば、データの圧縮ができる。一方、 $\{A_i\}$  と  $\{B_j\}$  が時間変化するデータであり、 $\{B_j\}$  が  $\{A_i\}$  の遅れたデータであれば、 $\{A_i\}$  の動きから  $\{B_j\}$  の動きを予測できる。

2つのデータの関係性を知る指標の1つとして、それらのデータの相関係数がよく用いられる。相関係数は、

$$\frac{\text{共分散}}{\text{各データの標準偏差の積}}$$

で定義される [2]。相関係数は  $[-1, 1]$  の範囲で値をとり、1に近いほど2つのデータの関係性が強いことを示している。値が1に近いときを順相関、-1に近いときを逆相関、0に近いときを無相関であるという。

本報告書では、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  と  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$  を変数にもつ確率変数  $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  の相関係数が最小、あるいは最大となるようなパラメータ  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  を求めることを考える。ただし  $\Phi$  と  $\Theta$  はある確率変数  $R_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ),  $U_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ) を用いて、

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n R_i x_i, \quad \Theta(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^m U_j y_j$$

と表されているとする。このとき、 $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  の相関係数  $\mu$  は次のように表される。

$$\mu(\Phi(\mathbf{x}), \Theta(\mathbf{y})) = \frac{\mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \quad (1)$$

ただし、 $V_{RU}$ ,  $V_{RR}$ ,  $V_{UU}$  はそれぞれ、 $\{R_i\}$  と  $\{U_j\}$ ,  $\{R_i\}$  と  $\{R_i\}$ ,  $\{U_j\}$  と  $\{U_j\}$  の分散共分散行列を表す。相関係数の詳細な定義は2節で与える。

確率変数  $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  を用いて  $\{R_i\}$  と  $\{U_j\}$  を分析する手法として、正準相関分析が知られている [4]。正準相関分析では、(1) で定義した相関係数を  $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  に制約なしで最大化するパラメータを求める。この最大化問題は一般化固有値問題に変形して解くことができる。

ところで、現実の最適化問題には何らかの制約が課されていることが多い。たとえば、 $\{R_i\}$  を経済指標の列とし、 $\Phi(\mathbf{x})$  をそれらの経済指標で模式化した新しい経済指標とする。さらに  $\{U_j\}$  を株式  $j$  の収益率の列とすると、 $\Theta(\mathbf{y})$  はポートフォリオの収益率とみなすことができる。いま、新しい経済指標  $\Phi(\mathbf{x})$  と、ポートフォリオ  $\Theta(\mathbf{y})$  の将来の収益率に高い相関があることがわかれば、 $\Phi(\mathbf{x})$  を用いて最適な投資ができるはずである。ここで  $\mathbf{y}$  はポートフォリオであることから、様々な制約がかかる [2]。制約付きの問題では、一般化固有値問題として解くことはできない。

本報告書では、制約付き相関係数を最適化する問題について考える。相関係数 (1) は、分母、分子ともにパラメータ  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  をもつため分数関数であり、この相関係数の最適化問題は分数計画問題となる。逐次二次計画法や内点法 [8] などの非線形計画問題に使われるアルゴリズムは分数の構造を利用していないため、分数計画問題を効率よく解くことはできない。分数計画問題に対しては、目的関数の分母、分子が共に凸関数であれば、効率よく解く手法が提案されている [9]。しかしながら、相関係数においては分母も分子も凸関数でないので、そのような手法を直接的に適用することはできない。

ところで、(1) において  $\mathbf{x}$  あるいは  $\mathbf{y}$  の一方を固定して、相関係数を  $\mathbf{x}$  または  $\mathbf{y}$  の関数とみなすと、その分母、分子は凸関数となることがわかる。そのため、一方を固定すれば既存の分数計画問題の解法で解くことができる。そこで本報告書では、 $\mathbf{x}$  と  $\mathbf{y}$  を交互に固定して解くことを考える。このような手順を利用するアルゴリズムは、ブロック座標降下法が知られている。ブロック座標降下法は適当な条件で大域的収束する [7]。一方の変数を固定した相関係数の最適化問題を解く際には、 $\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}}$  あるいは  $\sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}$  を目的関数に含む部分問題を解かなければならない。このような関数は一般には微分不可能であり、勾配を用いた手法を用いることができない。しかしながら、 $V_{RR}$ ,  $V_{UU}$  が半正定値対称行列であることを利用すると、この部分問題は二次錐計画問題 [1, 3] に帰着することができる。二次錐計画問題の解法としては内点法が知られており、容易に解くことができる。本報告書では、このような手順で制約つき分数計画問題を、逐次的に構成された簡単な部分問題を解くことによって解を求める。さらに数値実験によって、既存の非線形最適化に対する一般的なアルゴリズムと比較する。

本報告書の構成を以下に示す。2 節では、目的関数となる相関係数と、その最適化問題を解くために必要な概念について述べる。3 節では相関係数の制約つき最小化問題を定義する。4 節では、定義した問題をブロック座標降下法を用いて解く具体的なアルゴリズムを提案する。5 節では、提案アルゴリズムの有用性を確かめるため、数値実験によって既存のアルゴリズムと比較する。6 節では結論と今後の課題について述べる。

本報告書では、 $\|\mathbf{x}\|$  は  $\mathbf{x}$  の 2 ノルムを表す、また、 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T, \dots)^T$  を、 $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)$  と表記する。

## 2 準備

本節では、本報告書で扱う最適化問題の目的関数である相関係数と、ブロック座標降下法の概略を述べる。また、分数計画問題や二次錐計画問題について述べる。

### 2.1 相関係数

確率変数  $R_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) と  $U_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ) について、パラメータ  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  を用いて次のような線形和  $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  を考える。

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n R_i x_i, \quad \Theta(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^m U_j y_j$$

$R_i$ ,  $U_i$  の平均を  $r_i$ ,  $u_i$  とおけば、 $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  の共分散は

$$\begin{aligned} \sigma(\Phi(\mathbf{x}), \Theta(\mathbf{y})) &= E[\{\Phi(\mathbf{x}) - E[\Phi(\mathbf{x})]\}\{\Theta(\mathbf{y}) - E[\Theta(\mathbf{y})]\}] \\ &= E \left[ \left( \sum_{i=1}^n R_i x_i - \sum_{i=1}^n r_i x_i \right) \left( \sum_{j=1}^m U_j y_j - \sum_{j=1}^m u_j y_j \right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m E[(R_i - r_i)(U_j - u_j)] x_i y_j \\ &= \mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y} \end{aligned} \quad (2)$$

となる。ただし、 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ ,  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)^T$  である。また  $V_{RU}$  は分散共分散行列を表し、その  $(i, j)$  成分は  $R_i$  と  $U_i$  の共分散  $V_{RU}(i, j) = E[(R_i - r_i)(U_j - u_j)]$  である。同様に、 $V_{RR}(i, j) = E[(R_i - r_i)(R_j - r_j)]$ ,  $V_{UU}(i, j) = E[(U_i - u_i)(U_j - u_j)]$  である。分散共分散行列は半正定値対称行列となる。

式 (2) をみると、共分散は  $R_i$ ,  $U_j$  の平均値との大小関係が一致する場合に正の値を、異なる場合に負の値をとることがわかる。すなわち、共分散の値が大きいほど、確率変数の値の変化が近いことを意味する。ただしその大きさは確率変数の値によって変わるため、評価が難しい。そこで、共分散を各確率変数グループの標準偏差で割り、 $[-1, 1]$  の範囲に正規化した値が用いられる。これを相関係数という。 $\Phi(\mathbf{x})$ ,  $\Theta(\mathbf{y})$  の相関係数は (1) 式で表される。

$$\mu(\Phi(\mathbf{x}), \Theta(\mathbf{y})) = \frac{\mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \quad (3)$$

相関係数が 1 に近いときを順相関、-1 に近いときを逆相関、0 に近いときを無相関であるという。

## 2.2 ブロック座標降下法

問題の変数をブロックに分割し、あるブロックを変数とし、残りのブロックを定数とみなした問題を逐次的に解いて最適化する手法を、ブロック座標降下法という。

変数  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  に対して、これを  $N$  個のベクトル  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$  に分割する。ただし  $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^{d_j}$ ,  $\sum_j d_j = n$  ( $j = 1, \dots, N$ ) である。このとき、制約条件は  $\mathbf{x}_i$  ごとに分割できる。よって部分問題は次の最適化問題となる。

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}_i \in X_i, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

ただし  $X_i$  は  $\mathbb{R}^{d_j}$  の部分集合である。

目的関数  $f(\mathbf{x})$  は次のような逐次計算によって最小化できる。 $r$  回目の反復のとき  $\mathbf{x}^r = (\mathbf{x}_1^r, \mathbf{x}_2^r, \dots, \mathbf{x}_N^r)$  とする。 $r+1$  回目の反復において、適当なインデックス  $s$  を選び、 $\mathbf{x}_s$ のみを変数とみなす。それ以外の変数は固定して最適化を行う。すなわち

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_s^{r+1} &\in \arg \min_{\mathbf{x}_s \in X_s} f(\mathbf{x}_1^r, \dots, \mathbf{x}_{s-1}^r, \mathbf{x}_s, \mathbf{x}_{s+1}^r, \dots, \mathbf{x}_N^r) \\ \mathbf{x}_j^{r+1} &= \mathbf{x}_j^r \quad (\forall j \neq s) \end{aligned}$$

として  $\mathbf{x}^{r+1}$  の更新を行う。

ブロック座標降下法は、目的関数が凸関数であるときに大域的収束性が保証される。ただし、目的関数が凸関数でない場合でも、適当な条件を満たせば大域的収束することが研究されている [7]。その一例として、ブロック座標降下法で生成される部分問題がただ一つの解を持つとき、大域的収束することが知られている。

## 2.3 分数計画問題

関数の比を目的関数にもつ最適化問題

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \in D \end{aligned} \tag{4}$$

を分数計画問題という。実行可能領域  $D$  はコンパクトであり、 $f_1, f_2$  は  $D$  上で連続であるとする。さらに、全ての  $\mathbf{x}$  について  $f_2(\mathbf{x}) \geq N$  となるような  $N > 0$  が存在すると仮定すると、この分数計画問題は大域的最適解を持つ。最小化問題 (2) の最適解を  $\alpha$  と表すと、以

下の式 (a), (b) は等価であることが示されている [9].

$$(a) \quad \min_{x \in D} \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} = \alpha$$

$$(b) \quad \min_{x \in D} \{f_1(\mathbf{x}) - \alpha f_2(\mathbf{x})\} = 0$$

この等価性を利用すると、分数の最適化問題の代わりに、方程式 (b) を満たすパラメータ  $\alpha$  を求める問題となる. (b) の左辺のような問題はパラメトリック計画問題と呼ばれる. ここで簡単のため,

$$F(\alpha) := \min_{x \in D} \{f_1(\mathbf{x}) - \alpha f_2(\mathbf{x})\} \quad (5)$$

とおけば、最適化問題 (2) は一変数の非線形方程式  $F(\alpha) = 0$  となる  $\alpha$  を求める問題になる.

関数  $F(\alpha)$  は  $\mathbb{R}$  上で連続な凹関数であることが容易に示される [9]. また  $F(\alpha)$  は狭義単調減少関数であり、 $F(\alpha) = 0$  はただ 1 つの解をもつ. これらの性質から、非線形方程式の解法を用いれば、問題 (4) を解くことができる. しかしながら、 $F$  は  $\min$  演算を含んでおり一般に微分不可能な関数であるため、通常ニュートン法を用いることができない. そこで、 $F$  の劣勾配を利用する一般化ニュートン法 [5] を適用する. ある凸関数  $G$  の  $\beta$  における劣勾配とは、任意の  $\beta'$  に対し、

$$G(\beta') - G(\beta) \geq (\beta' - \beta)\eta$$

を満たす  $\eta$  のことである. 同様に、ある凹関数  $H$  の  $\gamma'$  における劣勾配は、任意の  $\gamma'$  に対し、

$$H(\gamma') - H(\gamma) \leq (\gamma' - \gamma)\eta' \quad (6)$$

を満たす  $\eta'$  である.  $F(\alpha)$  の最適解を  $\mathbf{x}(\alpha)$  とおいたとき、任意の  $\alpha' \in \mathbb{R}$  について、

$$\begin{aligned} F(\alpha') - F(\alpha) &= \min_{x \in D} \{f_1(\mathbf{x}) - \alpha' f_2(\mathbf{x})\} - \min_{x \in D} \{f_1(\mathbf{x}) - \alpha f_2(\mathbf{x})\} \\ &= \{f_1(\mathbf{x}(\alpha')) - \alpha' f_2(\mathbf{x}(\alpha'))\} - \{f_1(\mathbf{x}(\alpha)) - \alpha f_2(\mathbf{x}(\alpha))\} \\ &\leq \{f_1(\mathbf{x}(\alpha)) - \alpha' f_2(\mathbf{x}(\alpha))\} - \{f_1(\mathbf{x}(\alpha)) - \alpha f_2(\mathbf{x}(\alpha))\} \\ &= -(\alpha' - \alpha)f_2(\mathbf{x}(\alpha)) \end{aligned} \quad (7)$$

が成り立つ.  $F(\alpha)$  は凹関数であったので、(6) と (7) を比較すると、 $F(\alpha)$  の  $\alpha$  における劣勾配は  $-f_2(\mathbf{x}(\alpha))$  であることがわかる. このとき、 $F(\alpha) = 0$  に対する一般化ニュートン法における  $\alpha$  は、

$$\begin{aligned} \alpha^{k+1} &:= \alpha^k - \frac{F(\alpha^k)}{-f_2(\mathbf{x}(\alpha^k))} \\ &= \alpha^k - \frac{f_1(\mathbf{x}(\alpha^k)) - \alpha^k f_2(\mathbf{x}(\alpha^k))}{-f_2(\mathbf{x}(\alpha^k))} \\ &= \frac{f_1(\mathbf{x}(\alpha^k))}{f_2(\mathbf{x}(\alpha^k))} \end{aligned} \quad (8)$$



のように更新される。

## 2.4 二次錐計画問題

$\mathbb{R}^n$  上の部分集合  $C$  において、 $\mathbf{x} \in C$  と実数  $\lambda \geq 0$  に対して  $\lambda \mathbf{x} \in C$  が成り立つとき、 $C$  を錐という。特に、以下の形で表されるものは二次錐と呼ばれる。

$$K^n := \left\{ \mathbf{x} \mid x_1 \geq \sqrt{\sum_{i=2}^n x_i^2} \right\}$$

二次錐計画問題は、制約条件に二次錐制約  $\mathbf{x} \in K^n$  をもつ凸最適化問題のことであり、一般に次のように定義される。

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{f}^T \mathbf{x} \\ \text{s.t.} \quad & \begin{bmatrix} A_i \\ \mathbf{c}^T \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ d \end{bmatrix} \\ & \mathbf{x} \in K^n \end{aligned}$$

ただし、 $\mathbf{f}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n+1}$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$ ,  $d \in \mathbb{R}$  である。また、以下のような問題も二次錐計画問題として表せる。

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{f}^T \mathbf{x} \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}\| \leq \mathbf{c}^T \mathbf{x} + d \\ & \mathbf{x} \in X \end{aligned}$$

ただし、 $X \subset \mathbb{R}^n$  である。二次錐計画問題は、主双対内点法などを用いることで、高速に解くことができる。

## 3 相関係数の制約つき最適化モデル

本報告書では、次の相関係数最適化問題を考える。

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{\mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in Y \end{aligned} \tag{9}$$

ただし、 $X, Y$  は凸多面体とする。また、 $V_{RU}, V_{RR}, V_{UU}$  は 2.1 節で定義した分散共分散行列である。ここで、 $X = \mathbb{R}^n, Y = \mathbb{R}^m$  のとき、問題 (9) は一般化固有値問題に帰着できる。以下では、 $X, Y$  が全空間とならない応用例を挙げる。

### 3.1 ポートフォリオ最適化問題

価値が変動する資産に投資をするとき、投資家はできる限り大きな収益を得たいと考える。そのために最適なポートフォリオを求める問題を、ポートフォリオ最適化問題という。

資産  $j$  の購入当時の価値を  $P_j$ 、現在の価値を  $Q_j$  とする。資産  $j$  を  $z_j$  単位購入したとき、この投資から得られる総収益は、 $\sum_{j=1}^m (Q_j - P_j)z_j$  である。また総投資額は  $\sum_{j=1}^m P_j z_j$  である。投資による利益の程度を測る尺度を収益率と言う。収益率  $\Theta$  は総収益を総投資額で割った値であり、次のように表される。

$$\Theta = \frac{\sum_{j=1}^m (Q_j - P_j)z_j}{\sum_{j=1}^m P_j z_j} \quad (10)$$

全投資額に対する資産  $i$  への投資比率は、

$$y_j = \frac{P_j z_j}{\sum_{k=1}^m P_k z_k}, \quad j = 1, \dots, m \quad (11)$$

と表せる。このベクトル  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$  をポートフォリオと呼ぶ。(11) より、 $\mathbf{y}$  は

$$\sum_{j=1}^m y_j = 1, \quad y_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, m \quad (12)$$

を満たす。

(11) を (10) に代入すると、収益率は

$$\Theta(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^m \frac{(Q_j - P_j)y_j}{P_j}$$

となる。ここで  $U_j = (Q_j - P_j)/P_j$  とおけば、収益率は次のように表される。

$$\Theta(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^m U_j y_j$$

たとえば、同様に資産  $i$  の収益率

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n R_i x_i$$

を考えると、この収益率  $\Phi(\mathbf{x})$  が  $\Theta(\mathbf{y})$  に比べて古いデータであるとき、もし  $\Phi(\mathbf{x})$  と  $\Theta(\mathbf{y})$  が正または負の強い相関を持つならば、現在の資産  $i$  の収益率から、将来の資産  $j$  の取

益率を予測することができる。そこで  $\Phi(\mathbf{x})$  と  $\Theta(\mathbf{y})$  の相関係数最小化問題を考えると、問題は次のような制約つき最適化問題になる。

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{\mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^n x_i = 1, \quad \sum_{j=1}^m y_j = 1 \\ & x_i \geq 0, \quad y_j \geq 0 \end{aligned}$$

この問題では  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  に制約があり、正準相関分析を用いることができない。このような問題に対しては、制約つきの相関係数最適化問題を解く手法が必要となる。

## 4 相関係数の制約つき最適化モデルに対する解法

この節では、問題 (9) を解くためのブロック座標降下法を与え、その実装方法を議論する。ブロック座標降下法では、最小化問題の変数である  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  をそれぞれ別のブロックであるとみなし、交互に固定して最小化する。

### 相関係数の制約付き最小化問題に対するブロック座標降下法

**Step 0** 初期点  $\mathbf{x}^0$ ,  $\mathbf{y}^0$  を選ぶ。また  $\epsilon \in (0, 1)$  をとる。  $k := 0$  とする。

**Step 1**  $\mathbf{y}^k$  を固定した問題 (9), つまり

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{c^{kT} \mathbf{x}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}}} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \in X \end{aligned} \tag{13}$$

を解き、その解を  $\mathbf{x}^{k+1}$  とする。ただし

$$c^k = \frac{V_{RU} \mathbf{y}^k}{\sqrt{\mathbf{y}^{kT} V_{UU} \mathbf{y}^k}}$$

である。

**Step 2**  $\mathbf{x}^k$  を固定した問題 (9), つまり

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{d^{kT} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{y} \in Y \end{aligned} \tag{14}$$

を解き、その解を  $\mathbf{y}^{k+1}$  とする。ただし

$$d^k = \frac{V_{RU} \mathbf{x}^{k+1}}{\sqrt{\mathbf{x}^{k+1T} V_{UU} \mathbf{x}^{k+1}}}$$

である。

**Step 3**  $z^k := (\mathbf{x}^k \mathbf{y}^k)$  について,  $\|z^{k+1} - z^k\| \leq \epsilon$  ならば終了, でなければ  $k := k + 1$  として Step 1 に戻る.

部分問題 (13) や (14) は分数計画問題である. そこで 2.3 節で紹介した方法で解く. (13) の目的関数値を  $\alpha$  とおくと, 部分問題は 1 変数の非線形方程式  $F(\alpha) = 0$  となる. ただし,

$$F(\alpha) := \min_{\mathbf{x} \in X} \{ \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha \sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \}$$

である. この方程式を解くために一般化ニュートン法を用いる.  $F(\alpha^l)$  を与える最小化問題の最適解を  $\tilde{\mathbf{x}}^l$  とする. (8) より, 一般化ニュートン法の更新は,

$$\begin{aligned} \alpha^{l+1} &:= \frac{f_1(\tilde{\mathbf{x}}^l)}{f_2(\tilde{\mathbf{x}}^l)} \\ &= \frac{\mathbf{c}^{kT} \tilde{\mathbf{x}}^l}{\sqrt{\tilde{\mathbf{x}}^{lT} V_{RR} \tilde{\mathbf{x}}^l}} \end{aligned}$$

で与えられる.

以上をまとめると, 部分問題 (13) を解くための一般化ニュートン法のアルゴリズムは次のようになる.

### 分数計画問題に対する一般化ニュートン法

**Step 0**  $\alpha^1 = \{\mathbf{c}^{kT} \tilde{\mathbf{x}}^0\} / \{\sqrt{\tilde{\mathbf{x}}^{0T} V_{RR} \tilde{\mathbf{x}}^0}\}$  とする.  $l := 1$  とおく.  $\epsilon' \in (0, 1)$  を選ぶ.

**Step 1** 次の最小化問題を解き, 最適解  $\tilde{\mathbf{x}}^l$  を求める.

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l \sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \\ \text{s.t.} \quad & \tilde{\mathbf{x}}^l \in X \end{aligned} \tag{15}$$

**Step 2**  $|F(\alpha^l)| \leq \epsilon'$  ならば終了. でなければ,

$$\alpha^{l+1} = \frac{\mathbf{c}^{kT} \tilde{\mathbf{x}}^l}{\sqrt{\tilde{\mathbf{x}}^{lT} V_{RR} \tilde{\mathbf{x}}^l}}$$

と更新し,  $l := l + 1$  として Step 1 に戻る.

このアルゴリズムで重要となるのが, 部分問題 (15) をいかに解くかである. (15) は以下のようにして二次錐計画問題に変形できる.  $V_{RR}$  は分散共分散行列であり, 半正定値対称行列なので,  $V_{RR} = L^T L$ ,  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$  のようにコレスキー分解できる. よって問題 (15) の目

的関数は,

$$\begin{aligned} \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l \sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} &= \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l \sqrt{\mathbf{x}^T L^T L \mathbf{x}} \\ &= \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l \|L\mathbf{x}\| \end{aligned}$$

である. つまり (15) は

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l \|L\mathbf{x}\| \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x} \in X \end{aligned}$$

となる. さらにスラック変数  $t$  を導入すると, 次のような二次錐計画問題となる.

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathbf{c}^{kT} \mathbf{x} - \alpha^l t \\ \text{s.t.} \quad & \|L\mathbf{x}\| \leq t \\ & \mathbf{x} \in X \end{aligned}$$

この二次錐計画問題は, 内点法などで最適解を求めることができる.

## 5 数値実験

本節では, 相関係数最小化問題 (9) をランダムで生成し, Matlab の制約付き最小化問題に対するソルバー `fmincon` と提案手法を比較する. 実行環境は, CPU が Intel(R) Core(TM) i7-4560U 2.30GHz, メモリが 8GB の計算機上で行い, プログラムの実装には MATLAB R2013a (8.1.0.604) を用いた.

### 5.1 テスト問題の作成

テスト問題を作成するにあたって, 変数として分散共分散行列が必要となる. 分散共分散行列は半正定値対称行列であるため, 以下のように求めた. まず, ある行列  $A \in \mathbb{R}^{(n+m) \times (n+m)}$  を, 各成分が  $[-1,1]$  の値をとるように生成し,  $V = A^T A$  とした. さらに  $V$  を 4 分割して分散共分散行列  $V_{RU}, V_{RR}, V_{UU}$  を生成した. つまり,

$$V = \begin{bmatrix} V_{RR} & V_{RU} \\ V_{RU} & V_{UU} \end{bmatrix}$$

とした。また制約条件として、 $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  の各成分が 0 以上で、総和を 1 とした。すなわち、テスト問題は次のような相関係数最小化問題となる。

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{\mathbf{x}^T V_{RU} \mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T V_{RR} \mathbf{x}} \sqrt{\mathbf{y}^T V_{UU} \mathbf{y}}} \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^n \mathbf{x} = 1, \quad \sum_{j=1}^m \mathbf{y} = 1 \\ & x_i \geq 0, \quad y_j \geq 0 \end{aligned}$$

初期点は、 $V_{RU}$  の最小の要素  $(p, q)$  を探し、

$$\begin{aligned} x_i &= 1 \quad (i = p), & x_i &= 0 \quad (\forall i \neq p) \\ y_j &= 1 \quad (j = q), & y_j &= 0 \quad (\forall j \neq q) \end{aligned}$$

とした。

## 5.2 数値実験

実験では、 $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  の次元を共に  $n$  とし、これを問題サイズと定義する。 $n = 20, 40, 60, \dots, 300$  で変化させ、各サイズについてテスト問題を 50 個作成し、fmincon および提案手法によって計算した。提案手法での二次錐計画問題を解くソルバーとして、SeDuMi 1.3[6] を使用した。ブロック座標降下法の停止条件を、

$$\|(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k) - (\mathbf{x}^{k-1}, \mathbf{y}^{k-1})\| \leq \sqrt{2n} \times 10^{-5}$$

とした。分数計画問題に対する一般化ニュートン法の停止条件の閾値は  $10^{-5}$  とした。

問題サイズ、実行時間平均、並びに反復回数の平均をまとめたものを表 1 示す。さらに、問題サイズと平均実行時間の関係についてグラフにしたものを図 1 に、平均反復回数の関係をグラフにしたものを図 2 に示す。なお、2 つの手法において、導かれた最適解および最小値はほぼ一致した。

図 1 をみると、問題サイズが小さい場合は fmincon が非常に速く解に到達したのに比べ、提案手法ではその数十倍の時間がかかった。問題サイズが大きくなるにつれて、fmincon の実行時間は指数関数的に増加しているが、提案手法の実行時間は線形に増えている。問題サイズが 160 となるあたりで互いの実行時間が同程度となり、それより問題サイズが大きいときは、提案手法の方がより速く停止している。よって、小規模な問題では提案手法は有効でないが、大規模な問題では、提案手法を用いることで従来より速く解を求めることができる。

図 2 をみると、fmincon を用いた手法では反復回数が問題サイズにほぼ比例する形で増加している。提案手法においては、多少の波はあるものの、反復回数はほぼ横ばいとなってい

る。このことから、提案手法の計算時間は、内部反復の二次錐計画問題を解く部分が大きく影響していると考えられる。

提案手法では、問題のサイズが小さいときの計算時間が長くなっている。問題が簡単な場合、ニュートン法は数回の反復で収束するが、内点法は初期点が解の近傍とは限らないため、多くの反復を要することが経験的に知られている。それが速度に大きな差が生じた原因だと推察される。

表 1 fmincon と提案手法の平均実行時間および平均反復回数

問題サイズ	fmincon		提案手法	
	平均実行時間 [s]	平均反復回数	平均実行時間 [s]	平均反復回数
20	0.148	37.4	6.660	50.6
40	0.578	61.1	11.527	69.4
60	1.531	84.6	16.304	90.9
80	3.651	105.0	19.730	98.7
100	7.593	126.0	21.548	93.5
120	13.534	144.3	27.699	104.8
140	23.809	165.7	31.702	100.3
160	37.634	181.3	37.568	97.7
180	59.721	199.4	43.194	100.0
200	94.912	215.0	50.692	93.5
220	141.290	235.6	66.326	109.1
240	215.231	250.8	70.543	110.4
260	288.208	262.4	79.369	102.8
280	407.300	287.6	81.119	91.1
300	532.643	299.3	94.980	92.1

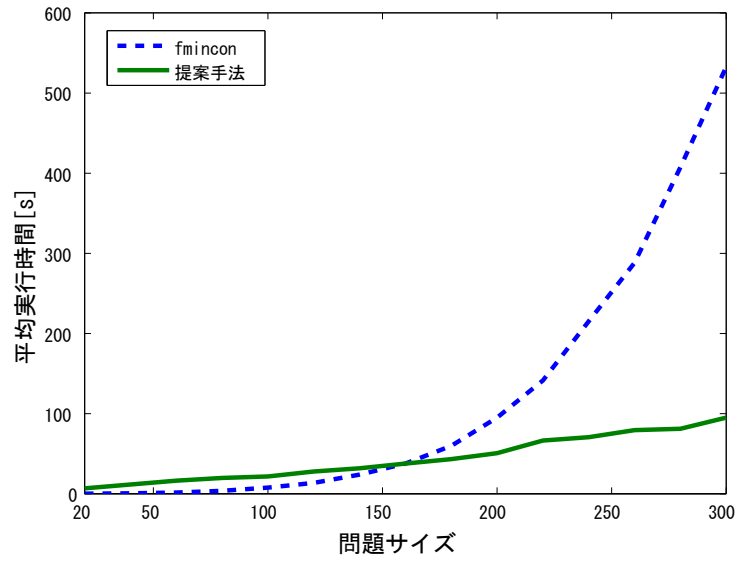


図1 fmincon と提案手法の実行時間の比較

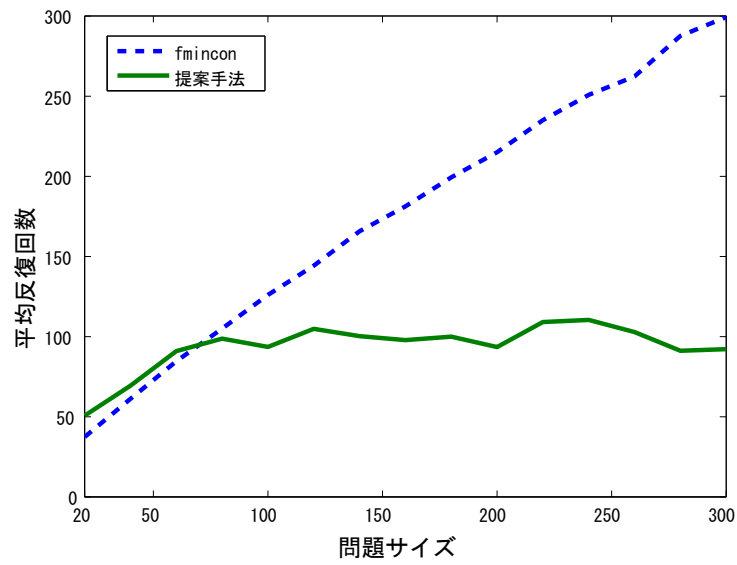


図2 fmincon と提案手法の反復回数の比較



## 6 結論と今後の課題

本報告書では、ブロック座標降下法を用いて、相関係数最小化問題を分数計画問題、さらに二次錐計画問題に変形し、逐次計算で解く手法を提案した。また数値実験により、大規模な問題を解く場合に提案手法が有効であることを示した。

一方で、小規模な問題の場合は、単純に計算する場合よりも非常に遅くなることが分かった。実験では、二次錐計画問題を解くのに内点法を採用したが、他のニュートン型手法を利用すれば、速度が改善される余地があると考えられる。そのような手法を考案することは今後の課題である。また、実データを用いて提案手法の有用性を確認することが必要である。

## 謝辞

日頃から御教授下さり、本報告書の作成にあたっては細部に至るまで様々な御指摘と適切な御指導を賜った山下信雄教授に深く感謝いたします。また、日頃からお世話になっている福田秀美助教、ならびに最適化数理研究室の皆様にも厚く御礼申し上げます。

## 参考文献

- [1] 福島雅夫, 非線形最適化の基礎, 朝倉書店, 2001
- [2] 今野浩, 理財工学 I, 日科技連, 1995
- [3] M. S. Lobo, L. Vandenberghe, S. Boyd, and H. Lebret, *Applications of Second-Order Cone Programming, Linear Algebra and its Applications Vol.284*, pp. 193–228, 1998.
- [4] 永田 靖, 棟近 雅彦, 多変量解析法入門, サイエンス社, 2001
- [5] L. Qi and J. Sun, *A Nonsmooth Version of Newton's Method, Mathematical Programming Vol. 58*, pp. 353–367, 1993.
- [6] J. S. Sturmfels, *Using Sedumi 1.02, A MATLAB Toolbox for Optimization over Symmetric Cones*, <http://sedumi.ie.lehigh.edu/>, 2001
- [7] P. Tseng, *Convergence of a Block Coordinate Descent Method for Nondifferentiable Minimization, Journal of Optimization Theory and Applications Vol.109*, pp. 475–494, 2001.
- [8] 矢部博, 工学基礎 最適化とその応用, 数理工学社, 2006
- [9] A. Zhang and S. Hayashi, *Celis-Dennis-Tapia Based Approach to Quadratic Fractional Programming Problems with Two Quadratic Constraints, Numerical Algebra, Control and Optimization Vol.1*, pp. 83–98, 2011.